Назва розробки: «КРИСТАЛОГЕОМЕТРИЧНА МОДЕЛЬ АТОМНОЇ СТРУКТУРИ МЕЖ ЗЕРЕН ГЦК- КРИСТАЛІВ».

Автори: Є.Ю. Бадіян, А.Г. Тонкопряд , О.В. Шеховцов.

Опис: запропонована кристалогеометрична модель жорстких меж зерен, яка враховує не тільки повні, але й часткові співпадіння атомів на межі. Таке наближення у розгляді структури меж зерен дозволило одержати значення ефективної енергії меж зерен (ступеню збіжності атомів на межі) залежної від кута дезорієнтації. Встановлено, що низька енергія спеціальних меж зерен визначається не тільки щільністю вузлів, які збігаються, а в більшій мірі щільністю короткоперіодичного візерунка із часткових збіжностей і, як наслідок цього, низька енергія спеціальних меж не завжди відповідає малим значенням оберненої щільності збіжних вузлів.

Інноваційні аспекти та переваги: на відмінність від відомих моделей структури меж зерен, наприклад, гратки співпадаючих вузлів, в яких ураховуються тільки повні збіжності атомів на межі, в моделі, що пропонується, враховуються не тільки повні, але й часткові співпадіння атомів на межі.

Поточна стадія розвитку: дослідний зразок.

Права інтелектуальної власності: 1.Бадиян Е.Е., Тонкопряд А.Г. Способ моделирования структуры поликристаллов //А.с. 1651313 СССР, кл. G 09 B 23/26. – №4351579/12; заявл. 28.12.87 опубл. 23.05.91, Бюл. № 19.
2. Бадиян Е.Е., Тонкопряд А.Г. Способ моделирования структуры поликристаллов //А.с. 1727153 СССР, кл.. G 09 B 23/26. – №4632394/12; заявл. 04.01.89; опубл. 15.04.92, Бюл. № 14. 3. Бадиян Е.Е., Тонкопряд А.Г. Способ моделирования структуры границ зерен поликристал-лов // А.с. 1727502 СССР, № 4600156;заявл. 21.10.88; (ДСП).

Існуючі та потенційні сфери застосування: запропонована модель може бути використана при вивченні властивостей меж зерен та структури полікристалів.

Тип потрібної співпраці: ліцензійна угода.